

Изучалась  $p^{++}$ -Si/SiN<sub>x</sub>/Ni мемристорная структура с толщиной слоя SiN<sub>x</sub> 32 нм. Нестехиометрический нитрид кремния SiN<sub>x</sub> получен с помощью плазмохимического метода. Никелевый электрод площадью 0.5 мм<sup>2</sup> получался с помощью магнетронного распыления. Мемристор на основе нестехиометрического SiN<sub>x</sub> является бесформовочным (рис. 1.а). Механизм переноса заряда в мемристоре на основе SiN<sub>x</sub> изучался в первичном состоянии (VS), высокоомном состоянии (HRS), низкоомном состоянии (LRS) и промежуточном состоянии (IS) (рис. 2.б). Механизм переноса заряда мемристора на основе SiN<sub>x</sub> во всех резистивных состояниях описывается током, ограниченным пространственным зарядом (ТОПЗ) [1-2]:

$$I = Se\mu n(T) \frac{U}{d} + S \frac{9}{8} \mu \varepsilon \varepsilon_0 \theta(T) \frac{U^2}{d^3} \quad (1)$$

Где  $e$  – заряд электрона,  $\mu$  – подвижность,  $n$  – концентрация свободных носителей,  $U$  – напряжение,  $d$  – толщина,  $\varepsilon$  – статическая диэлектрическая константа,  $\theta$  – степень заполнения ловушек,  $S$  – площадь, участвующая в переносе заряда.

Исследования поддержаны грантом РФФИ № 18-49-08001.

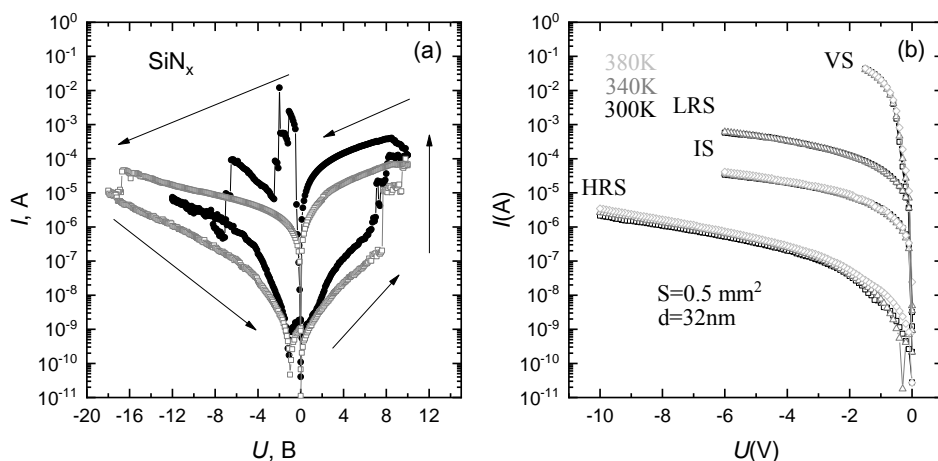


рис. 1.а Первый и пятый цикл развертки мемристора на основе SiN<sub>x</sub>.

рис. 1.б Температурные зависимости тока в разных состояниях мемристора на основе SiN<sub>x</sub>.

Список публикаций:

[1] N. F. Mott, R. W. Gurney, J. Phys. Chem., 45, 7, 1142–1142 (1941).

[2] M. A. Lampert, P. Mark, Current injection in solids, Academic Press, NY, USA, (1970)

## Особенности развертки зон для кристаллов CaF<sub>2</sub> и CdF<sub>2</sub>

Додонова Татьяна Вадимовна

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович

[dovata.f-121@mail.ru](mailto:dovata.f-121@mail.ru)

Метод развертки зон в первоначальной формулировке рассматривался как один из эффективных способов исследования систем с нарушением пространственной периодичности [1-4]. В основе этого подхода лежит идея отображения точек обратного пространства с «переносом» соответствующих дисперсионных зависимостей, например зон электронных состояний  $E_{NK}$ , где  $N, K$  – номер энергетического уровня и точка зоны Бриллюэна, в точку  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{G}_K$ , которая соответствует зоне Бриллюэна решетки с другим типом пространственной периодичности. За исключением простого случая кратного расширения элементарной ячейки, трансляционная симметрия одночастичных состояний  $\psi_{NK}$  сохраняется не полностью, а лишь «частично», т.е. теореме Блоха для вектора  $\mathbf{k}$  будет подчиняться только доля  $\psi_{NK}$ , вес которой  $W_{KN}(\mathbf{G}_K)$  можно определить стандартными методами теории групп, [5]:

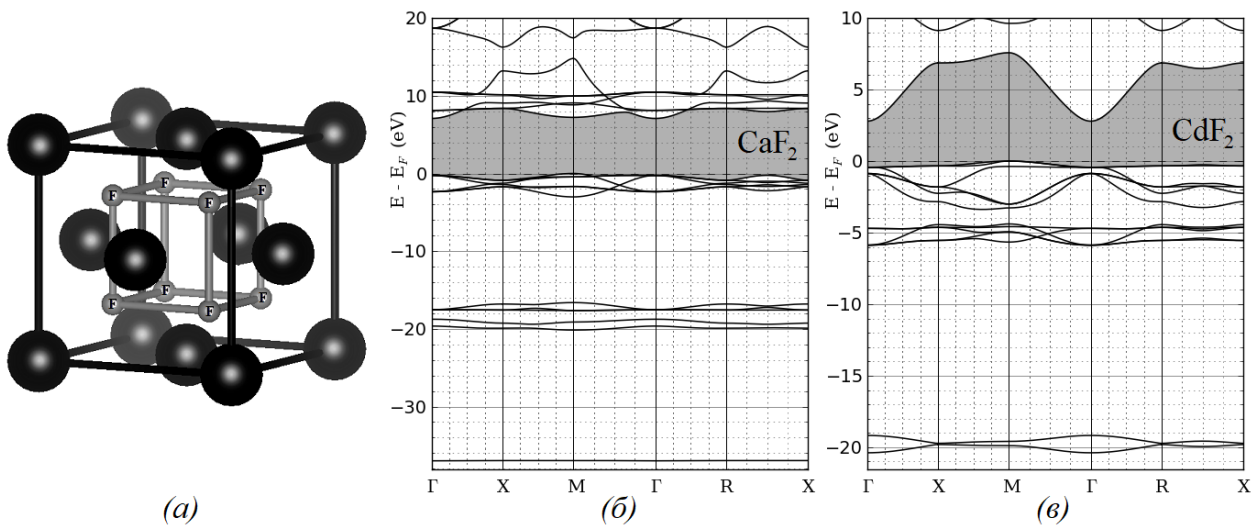
$$W_{KN}(\mathbf{G}_K) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^V \langle \psi_{NK} | T(\mathbf{r}_j) | \psi_{NK} \rangle e^{-i(\mathbf{K} + \mathbf{G}_K) \cdot \mathbf{r}_j}, \quad 0 \leq W_{KN} \leq 1, \quad (1)$$

где использованы обозначения [5]. Тогда зонная структура  $E_{NK}$ , развернутая в зону Бриллюэна решетки с иной периодичностью может быть представлена с помощью спектральной функции:

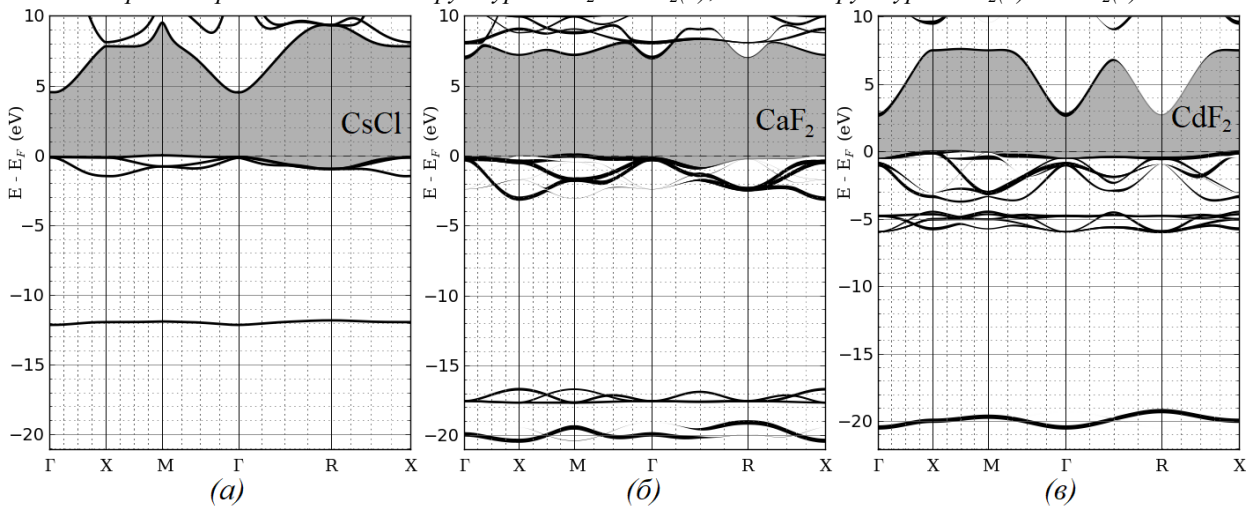
$$A(\mathbf{k}, E) = \sum_N W_{\mathbf{k}N}(\mathbf{G}_\mathbf{k}) \delta(E - E_{N\mathbf{k}}). \quad (2)$$

В настоящей работе метод развертки зон применяется для рассмотрения особенностей зонной структуры идеальных кристаллов, в структуре которых можно выделить подрешетки, трансляционная симметрия которых отличается от симметрии кристалла как целого. Классическим случаем такого типа являются кристаллы со структурой флюорита, которые имеют гранецентрированную кубическую решетку (ГЦК), но содержат идеальную простую кубическую подрешетку (ПКР), образованную атомами только одного типа, *рис.1*. В этом случае представляется интересным исследовать насколько симметрия ПКР сохраняется в структуре электронного спектра идеального кристалла, а также какие условия, кроме чисто геометрических, могут оказывать влияние на эффект такого сохранения, что определяет цель данной работы.

В качестве объектов исследования выбраны кристаллы  $\text{CaF}_2$  и  $\text{CdF}_2$  и для сравнения  $\text{CsCl}$  (ПКР). Расчеты электронной структуры выполнялись в локальном приближении теории функционала плотности с использованием базиса локализованных псевдоатомных *single*- и *double*- $\zeta$  орбиталей, а также реализации [6] вычисления спектральной функции (2). Зонные структуры представлены на *рис.1*, а на *рис.2* их развертки в зону Бриллюэна ПКР.



*рис.1. Кристаллическая структура  $\text{CaF}_2$  и  $\text{CdF}_2$ (а); зонная структура  $\text{CaF}_2$ (б) и  $\text{CdF}_2$ (в)*



*рис.2. Зонная структура  $\text{CsCl}$ (а), спектральные функции  $\text{CaF}_2$ (б) и  $\text{CdF}_2$ (в)*

Из сравнения с зонной структурой  $\text{CsCl}$ , *рис.2(а)*, видно, что для  $\text{CaF}_2$ , *рис.2(б)*, развертка практически полностью восстанавливает зоны анионных s- и p-состояний, а разрывы на линии  $\Gamma$ -R можно связать с влиянием поля ГЦК решетки катионов. В случае  $\text{CdF}_2$ , *рис.2(в)*, трансляционная симметрия ПКР сохраняется только для s-зоны фтора, а для состояний верхней валентной зоны, она полностью нарушена, что обусловлено эффектом гибридизации с d-состояниями катионов. Таким образом, метод развертки зон в применении к идеальным кристаллам позволяет различать случаи, когда можно говорить о «физической» подрешетке,

которая является почти самостоятельной единицей кристалла, либо только о «геометрической», структура которой не является определяющей для электронных свойств кристалла.

Список публикаций:

- [1] Dagram T.G., Capaz R.B., Koiler B. // *Phys. Rev.B.* 1997. V. 56. P. 9625.
- [2] Wang L.W., Bellaiche L., Wei S.H., Zunger A. // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. P. 4725.
- [3] Boykin T.B., Klimeck G. // *Phys. Rev. B.* 2005. V. 71. P. 115215.
- [4] Boykin T., Kharche N., Klimeck G. // *Phys. Rev.B.* 2007. V. 76.P. 035310.
- [5] Allen P.B., Berlijn T., Casavant D.A., Soler J.M.// *Phys. Rev. B.* 2013. V. 87. P. 085 322.
- [6] Гордиенко А.Б., Кособуцкий А.В. // *ФТТ.* 2016. Т. 58. № 3. С. 451-457.

## Структурные и электронные свойства интерфейса графен/силицен

**Евсеев Кирилл Васильевич**

Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова

Шарин Егор Петрович, д.ф.-м.н.

[k.evseev97@gmail.com](mailto:k.evseev97@gmail.com)

В последнее время двумерные материалы вызвали большой интерес благодаря их уникальным свойствам. Недавно была теоретически предсказана и синтезирована экспериментально кремниевая версия графена - силицен. Если графен имеет планарную структуру вследствие полной  $sp^2$ -гибридизации, то силицен является структурой с низким изгибом вследствие частичной  $sp^2$ - $sp^3$ -гибридизации атомов кремния [1]. Многие уникальные свойства графена также можно наблюдать в силицене, включая его характерное поведение электронов типа Дирака. По сравнению с графеном манипулирование силиценом может быть совместимо с существующей кремниевой промышленностью. Однако у силицена также отсутствует запрещенная зона, которая чрезвычайно важна для электронных устройств [2]. Поэтому поиск действенного способа открыть значительную энергетическую пропасть все еще остается насущной проблемой.

В настоящей работе исследуются структурные и электронные свойства интерфейса графен/силицен. Структура такого интерфейса представляет собой силицен, наложенный на слой графена таким образом, что он составляет сверхрешетку.

Все вычисления проводились с использованием программы Quantum Espresso. В основе лежит метод псевдопотенциала с использованием плоских волн в рамках теории функционала плотности (DFT). Влияние остовных электронов учитывалось путем использования ультрамягких псевдопотенциалов. Использовался нелокальный обменно-корреляционный функционал в параметризации Perdew-Zunger (PZ). Энергия обрезания плоских волн для самосогласованного расчета составляла 60 Ry. Для интегрирования линейной зоны Бриллюэна была использована сетка  $5 \times 5 \times 1$  в обратном пространстве.

Таким образом была рассчитана зонная структура суперячеек интерфейса графен/силицен  $3 \times 3$ ,  $5 \times 5$  и  $7 \times 7$ . Зонную структуру суперячейки  $3 \times 3$  с одним допированным атомом азота показан на рисунке снизу (рис.1).

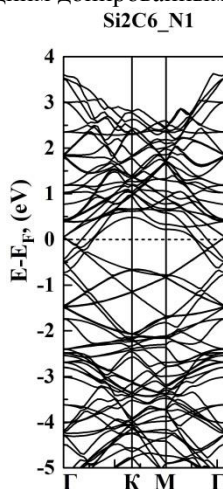


рис.1. Зонная структура суперячейки  $3 \times 3$  с одним допированным атомом азота.

Список публикаций:

- [1] Patrick B. Benasutti. *Electronic and Structural Properties of Silicene and Graphene Layered Structures* (2012).
- [2] Andres Castellanos-Gomez. *Strain engineering in semiconducting two-dimensional crystals*, *Journal of Physics Condensed Matter* (2015).